# スカラー計算機とベクトル計算機における固有値コードの性能評価(数値計算アルゴリズムの現状と展望II)



別府, 良孝

数理解析研究所講究録
915巻 1995年 28-33



# スカラー計算機とベクトル計算機における固有値コードの性能評価

聖徳学園女子短大・情報系　　別府 良孝(Yoshitaka BEPPU)

## §1．はじめに

実対称三重対角行列Ｔに関する標準固有値問題$Tv_i=\lambda_i v_i$(i=1,2,･･･,m,･･n)を解くために[1)]、種々の固有値コードが開発されているが、それらのコードを速度と精度の両面から性能評価したので報告する。固有値コードとしては、分割統治コード・ホモトピーコード・ＮＩＣＥＲ・ＮＵＭＰＡＣ・ＥＩＳＰＡＣＫ・ＬＡＰＡＣＫを取り上げ、スカラー計算機とベクトル計算機における測定結果を報告する。

## §2．テスト行列について

以下の行列をテスト行列として用いた。これらは、Ｊ、Ｃ、Ｇ、Ｌ、Ｗ、Ｆ、Ｂ、Ｒ、Ｈ行列と略記する。

Jahn $\quad d_i = m+1, s_{2i} = k\sqrt{i}, s_{2i-1} = k\sqrt{m+i}$

Constant $\quad d_i = 4, s_i = 1$

Graded $\quad d_i = i, s_i = 1$

Laguerre $\quad d_i = 2i-1, s_i = i$

Wilkinson
$$d_i = \begin{cases} \frac{n}{2} - i + 1 & (1 \le i \le \frac{n}{2}) \\ i - \frac{n}{2} & (\frac{n}{2}+1 \le i \le n) \end{cases} \qquad s_i = -1$$

Franck $\quad A_{ij} = n+1-\max(i,j)$

Block
$$A_{ij} = 4\delta(i,j) - \sum_{k=1}^{r-1}\sum_{m=0}^{r-2} B$$
$$\text{where } r = \sqrt{n}$$
$$\begin{aligned} B = {} & \delta(i,k+1+rm)\cdot\delta(j,i+r-1) \\ & +\delta(i,k+rm)\cdot\delta(j,i+r+1) \\ & +\{\text{exchange of i and j}\} \end{aligned}$$

Random $\quad -32768 < A_{ij} < +32768$

Huckel
$$A_{ij} = -7.2\delta(i,j) - \frac{3.0}{(i-j)^2}\{1-\delta(i,j)\}$$

§３．ＱＲ法におけるシフト戦略について[2)]

“平方根付きＱＲ法”の収束を加速するためのシフト戦略として、ＱＲループに入る前に全ての固有値を“無平方根ＱＲ法”で求める“ループ前究極シフト法” や ＱＲループの内で固有値を一個づつ求める“ループ内高次シフト法”が提案されてきた。“ループ内高次シフト法”の場合、与えられたＴがデフレーションの結果、ｋ次の左上三重対角行列と（ｎ－ｋ）次の右下対角行列とに分解されるので、シフト量$\mu$としては、ｋ次の左上三重対角行列の右下Ｌ次の小行列の固有値を用いればよい。小行列の固有値は、“無平方根ＱＲ法”・“ニュートン法”・“ラゲール法[3)]”のいずれかを用いて見積もる事ができる。

既発表のデータ[2)]および新規データに基づいて、以下のごとく結論した。

（ａ）ループ前究極シフト法について

このシフト法は、近接・縮退固有値が苦手で、２ｎ語の作業領域が必要である。速度も精度も、ＬＵ逆反復法に劣る場合が多い。だからこそ、Parlettも「The fastest way to compute a full set of eigenvectors is to execute QL algorithm with the fast Givens rotation using the previously computed eigenvalues as origin shifts. This combination of techniques seems to have been overlooked so far.」と述べているのであろう。

（ｂ）ループ内高次シフト法について

ｂ１．ニュートン法やラゲール法は、近接・縮退固有値が苦手で、あふれの心配が有る。高速化したければ、Ｌ語の作業領域が必要である。

ｂ２．無平方根ＱＲ法は、近接・縮退固有値にも強く、あふれの心配は無いが，２Ｌ語の作業領域が必要である。

ｂ３．固有値の精度は、Ｌを大きくしても、余り改善されない。

ｂ４．固有ベクトルの精度は、Ｌ＝０．１０ｎとＬ＝ｎの時に改善される場合が多い。

ｂ５．ｎ＝１００、２６５、４００、６２５でのテスト結果によれば、ベストなＬは、ｎにも依存する。ｎ＝１００ならＬ＝０．２０ｎに、ｎ＝６２５ならＬ＝０．０３ｎにすれば良い[4)]。

ｂ６．ＦＡＣＯＭ－ＶＰ－２００、ＮＥＣ－ＳＸ２、ＨＩＴＡＣ－Ｓ８２０、ＦＡＣＯＭ－ＶＰ－２６００、ＮＥＣ－ＳＸ３でのテスト結果によれば、ベストなＬは、ベクトル加速率にも依存する。ＶＰ－２００ならＬ＝０．２０ｎに、ＳＸ３ならＬ＝０．０３ｎにすれば良い[4)]。

ｂ７．収束に必要な平面回転の数やＱＲ変換の数は、Ｌ∝ｎ とすると Ｌに関して振動する場合があるが、Ｌ∝ｋ とすればＬとともに漸減する。

## §４．固有値のみを求める場合の性能評価

表１には使用コード名が、表２には９００次元のＴのすべての固有値をスカラー機で求めるのに要したＣＰＵ時間が、表３には９００次元のＴのすべての固有値をベクトル機で求めるのに要したＣＰＵ時間が、表４には得られた固有値の絶対誤差が、示されている。これらのデータに基づいて、以下のごとく結論した。

（ａ）．速度に関しては、NUMPACの中の無平方根ＱＲコードが最高速である。
（ｂ）．精度に関しては、分割併合ホモトピー法のＨＲＳＴ(Homotopy for Real Symmetric Tridiagonal)[5、6]が最高精度である。
（ｃ）．ＱＲ法は、ｎが１０００を超えるとデフレーションエラーのために精度が低下する。だからこそ、Parlettは「The QR algorithm is the most effective way of finding all the eigenvalues of a small matrix.」と述べている。

| algorithm | code | coder | year |
|---|---|---|---|
| 二分割法 | DSTEBZ | Lapack | 1992 |
| 多分割法 | HOBSVW | Ninomiya | 1984 |
| 平方根付ＱＲ | HOQRVW | Ninomiya | 1984 |
| 無平方根ＱＲ | DSTERF | Lapack | 1992 |
| 無平方根ＱＲ | NSHOUD | Beppu | 1982 |
| 分割併合ホモトピー法 | HRST | K.Li,T.Y.Li & Z.Zeng | 1994 |

表１．テストに使用した固有値コード。

| code | F | B | R | H | J | C | G | L |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| DSTEBZ | 6112 | 1807 | 9548 | 6681 | 8178 | 6236 | 8179 | 8469 |
| DSPMG | 2492 | 4294 | 3130 | 3177 | 1458 | 3207 | 1042 | 3072 |
| DSTERF | 951 | 947 | 1355 | 1197 | 1040 | 1277 | 790 | 1172 |
| NSHOUD | 294 | 436 | 519 | 397 | 346 | 420 | 313 | 484 |
| HOQRVW | 466 | 753 | 923 | 702 | 619 | 864 | 553 | 887 |
| HOBSVW | 7851 | 7911 | 7903 | 7908 | 7923 | 7915 | 7919 | 7919 |

表2.Cpu-time (milli sec.) for finding all the eigenvalues when n=900
FACOM-M-1800 was used on March, 1994.

| code | F | B | R | H | J | C | G | L |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| DSTEBZ | 6089 | 1797 | 9500 | 6637 | 8131 | 6199 | 8133 | 8419 |
| DSPMG | 2398 | 4141 | 3019 | 3061 | 1407 | 3088 | 1004 | 2951 |
| DSTERF | 485 | 478 | 689 | 607 | 531 | 651 | 401 | 596 |
| NSHOUD | 290 | 427 | 512 | 391 | 340 | 414 | 308 | 476 |
| HOQRVW | 462 | 745 | 911 | 693 | 611 | 855 | 546 | 876 |
| HOBSVW | 132 | 132 | 131 | 131 | 131 | 131 | 131 | 132 |

表3.Cpu-time (milli sec.) for finding all the eigenvalues when n=900.
FACOM-VP-2600 was used on March, 1994.

| code | F | B | R | H | J | L | W |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| DSTEBZ | 2.1D-11 | 1.8D-11 | 5.8D-10 | 1.3D-11 | 1.3D-11 | 1.2D-11 | 1.2D-11 |
| DSPMG | 1.3D-14 | 1.1D-14 | 2.6D-11 | 1.9D-16 | 1.9D-14 | 2.6D-14 | 3.1D-14 |
| DSTERF | 4.3D-13 | 1.0D-13 | 2.0D-08 | 1.0D-13 | 1.2D-11 | 6.6D-12 | 1.1D-11 |
| NSHOUD | 2.9D-07 | 1.2D-13 | 5.3D-08 | 3.9D-13 | 7.7D-12 | 6.5D-12 | 6.5D-11 |
| HOQRVW | 3.2D-12 | 1.5D-13 | 5.1D-08 | 1.4D-13 | 2.1D-11 | 3.1D-11 | 5.3D-11 |
| HOBSVW | 1.6D-07 | 2.5D-10 | 3.3D-05 | 5.2D-10 | 2.7D-08 | 1.0D-07 | 1.3D-08 |

表4.Eigenvalue error $\Delta\lambda$ for the case of n=900.
FACOM-VP-2600 was used on March, 1994.

## §５．固有対を求める場合の性能評価

すべての固有値と固有ベクトルを求めるために、表５に示した固有値コードを使用し[2]、以下の結論を得た。

（ａ）．スカラー機で固有対を高速に求めたければ、ＱＲ・逆反復法のＱＲＩＩコード[7]を用いるとよい。

（ｂ）．ベクトル機で固有対を高速に求めたければ、中次シフト法のＱ１０コードを用いるとよい。

（ｃ）．固有ベクトルを精度よく求めたければ、ＨＲＳＴＩＩコードまたはＨＯＭＯコード[8]を用いるとよい。

（ｄ）．ホモトピーコードの高速性は確認できなかった。

| algorithm | code | coder | year |
|---|---|---|---|
| 平方根付ＱＲ(D2 shift) | D2 | Ninomiya | 1984 |
| 平方根付ＱＲ(Q10 shift) | Q10 | Beppu | 1990 |
| 平方根付ＱＬ(D2 shift) | TQL2 | Eispack | 1976(1992) |
| 平方根付ＱＲ／ＱＲ (D2 shift) | DSTEV | Lapack | 1992 |
| 分割統治[9] | TREEQR | Dongarra | 1987 |
| 無平方根ＱＲ + 逆反復 | QRII | Beppu-Ninomiya | 1982 |
| 分割併合 + 逆反復 | HRSTII | Li, Li & Zeng | 1994 |
| ホモトピー | HOMO | Li & Rhee | 1989 |

表５．テストに使用した固有値コード。

## §６．おわりに

今後も固有値コードの性能評価は機会有るごとになされるであろうが、ＨＲＳＴコード・ＱＲＩＩコード・Ｑ１０コードを含めての性能評価が望まれる。

謝　辞：電算機を使用させていただいた、名大・京大・東大・分子研の大型計算機センターに深謝いたします。

参 考 文 献：

1)B.Parlett:The Symmetric Eigenvalue Problem (1980) Prentice-Hall.

2)Y.Beppu,"Origin-Shift Straregies in the QR method",PCG94(1994)251.

3)H.Isaka,Y.Beppu and K.Takeuchi:ＱＲ法の原点移動方法の比較、数値解析シンポジウム (1991)

4)S.Sasaki,H.Isaka and J.Yorozu:ＳＸ－３におけるＱＲ法の原点移動方法の比較、情報処理学会第４３回全国大会(1991)

5) TY.Li & Z.Zeng: Laguerre's Iteration in Solving the Symmetric Tridiagonal Eigenploblem ,SIAM J.Sci.Comp.15(1994)1145.

6)K.Li,"A Fully Parallel Method for Tridiagonal Eigenvalue Problem", Int.J.Math.Math.Sci.,(1994)

7)Y.Beppu & I.Ninomiya,"HQRII:A Fast Diagonalization Subroutine", Computers & Chemistry,Vol.6(1982)87.

8)T.Li and N.Rhee: Homotopy Algorithms for Symmetric Eigenvalue Problems,Numer.Math.55(1989)265.

9)J.Dongarra and D.Sorensen: A Fully Parallel Algorithm for the Symmetric Eigenvalue Problem, SIAM J.Sci.Stat.Comput.8(1987)139.